

Оценка эффективности одновременного моделирования нескольких состояний турбулентного течения на примере задачи о прямом расчете турбулентного обтекания массива кубов

Б.И. Краснопольский

НИИ механики МГУ

Работа посвящена дальнейшему развитию предложенной вычислительной процедуры для прямого численного моделирования турбулентных течений. Модифицированный алгоритм основан на одновременном моделировании нескольких состояний течения. Приводятся простейшие оценки эффективности в сравнении с традиционным подходом, основанным на длительном осреднении по времени одного состояния течения. Указанные теоретические оценки сравниваются с результатами численных экспериментов для задачи прямого численного моделирования обтекания турбулентным потоком массива кубов, расположенных на стенке канала.

Ключевые слова: турбулентные течения, прямое численное моделирование, системы линейных алгебраических уравнений с несколькими правыми частями, GSrMV, разреженные матрицы, ускорение

1. Введение

Вопрос совершенствования методов и алгоритмов для численного моделирования турбулентных течений многие годы является одной из насущных проблем вычислительной гидрогазодинамики, что обусловлено высокой практической значимостью приложений в науке и технике. По мере развития вычислительной техники акцент при выборе методов смещается в сторону использования высокоточных математических моделей описания турбулентных течений, таких как метод крупных вихрей или прямое численное моделирование уравнений Навье-Стокса. Для данных моделей характерно использование подробных расчетных сеток и длительные времена интегрирования задач для получения статистически корректных характеристик турбулентного течения. Если обработка больших пространственных сеток в настоящее время не является большой проблемой, и в большинстве случаев может быть эффективно распараллелена за счет геометрической декомпозиции расчетной области между вычислительными процессами, то распараллеливание по времени в большинстве случаев оказывается невозможным из-за жесткой зависимости по данным между различными шагами по времени.

В [1] был предложен новый подход, допускающий возможность распараллеливания расчета турбулентного течения по времени за счет дополнительных накладных вычислений. Традиционные подходы расчета турбулентных течений предполагают проведение нестационарных расчетов с длительным осреднением по времени для набора статистики. Конкретная реализация турбулентного течения зависит от множества факторов, в том числе: начальных данных, точности решения систем уравнений, схем разностной аппроксимации дифференциальных уравнений и многих других, и как таковая не представляет практического интереса. При этом, осредненные характеристики установившегося турбулентного течения остаются неизменными независимо от начальных данных и особенностей численных схем, отражая именно свойства турбулентного течения. Вообще говоря, это дает возможность проводить несколько более коротких по времени интегрирования расчетов с последующим осреднением результатов. Для данных расчетов должно выполняться требование некоррелированности решений между собой, что для турбулентного течения, в большинстве слу-

чаев, решается путем выбора различных начальных данных.

Предложенный подход обладает явным преимуществом в виде возможности распараллеливания по времени и сокращения общего интервала интегрирования задачи. Существенным недостатком, однако, является необходимость проведения дополнительных расчетов развития турбулентного потока с начальных полей скоростей для нескольких дополнительных реализаций течения. Эта особенность несколько ограничивает потенциал предложенного подхода и требует выработки априорных критериев его применимости.

С математической точки зрения, для расчета турбулентных течений несжимаемой жидкости обычно применяются проекционные схемы интегрирования по времени высоких порядков [2, 3], где основное время расчета тратится на решение эллиптических уравнений, обеспечивающих бездивергентность поля скорости. Для решения соответствующих систем линейных алгебраических уравнений в областях сложной формы наиболее эффективными и робастными представляются вычислительные алгоритмы, сочетающие в себе итерационные методы подпространства Крылова и многосеточные методы. Эффективность их программной реализации во многом определяется эффективностью реализации базовой операции – умножения разреженной матрицы на вектор (SpMV). Известно, что эффективность операции типа SpMV можно повысить при организации вычислений одновременно с блоками векторов (Generalized SpMV), $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$, где матрицы $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$ содержат m столбцов [4]. Такое повышение производительности обусловлено рядом факторов, а именно: сокращением объема трафика к оперативной памяти для чтения матрицы $\mathbf{A}$ (уменьшение объема в пересчете на один вектор правой части), регуляризацией шаблона доступа к памяти и векторизацией вычислений, а также улучшением масштабируемости данной операции при параллельной реализации за счет увеличения объема вычислений на количество передаваемых сообщений по коммуникационной сети вычислительной системы.

Основываясь на указанных выше соображениях, в [1] для произвольного m предложена простая оценка вида:

$$P_m = \frac{1 + \beta}{m + \beta} \frac{5m}{2m + 3}, \quad (1)$$

характеризующая ускорение расчета турбулентного течения при одновременном расчете нескольких реализаций течения по сравнению с длительным расчетом единичной реализации течения за счет более эффективных методов решения систем уравнений с несколькими правыми частями. Первый множитель в (1) учитывает накладные расходы на моделирование процесса перестроения дополнительных $(m - 1)$ реализаций турбулентного течения, а второй – ожидаемое ускорение за счет одновременного решения системы уравнений $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$ с m правыми частями по сравнению с m -кратным решением системы уравнений с единичной правой частью. Данная оценка содержит два параметра. Параметр β отражает соотношение интервалов времени осреднения турбулентного течения к начальному интервалу интегрирования с начального поля скоростей до выхода на турбулентный режим. Этот параметр является входным для данной оценки и определяется для каждой конкретной задачи спецификой моделируемого течения. Второй параметр, m , задает количество одновременно рассчитываемых реализаций турбулентного течения и выбирается исходя из (1) таким образом, чтобы максимизировать общее ускорение расчета.

Целью настоящей работы является экспериментальная проверка полученных ранее теоретических оценок и демонстрация возможности ускорения расчета турбулентного течения за счет одновременного моделирования нескольких реализаций течения на примере задачи о моделировании турбулентного течения при обтекании массива кубов, расположенных на стенке плоского канала [5, 6].

2. Приложения для расчета нескольких реализаций течения

Для проверки работоспособности предложенного модифицированного алгоритма и сопутствующих теоретических оценок было разработано приложение для расчета нескольких реализаций турбулентного течения. Разностная аппроксимация в данном приложении строится в соответствии с конечно-разностным методом второго порядка точности по пространству, позволяющим моделировать течения несжимаемой жидкости в криволинейных ортогональных системах координат [7]. Для интегрирования по времени используется полуневьяная схема Рунге-Кутты 3-го порядка точности с выбором оптимального шага интегрирования [2]. Данный код позволяет проводить параллельные расчеты за счет трехмерной декомпозиции расчетной сетки на блоки одинакового размера.

Для решения систем линейных алгебраических уравнений используется библиотека SparseLinSol [8], для которой было разработано обобщение на случай решения систем уравнений с несколькими правыми частями. Указанная библиотека содержит гибридную реализацию численных методов в рамках модели программирования MPI + POSIX Shared Memory и поддерживает многоуровневую логическую иерархию распараллеливания вычислений и синхронизации вычислительных процессов. Для вычислительной системы “Ломоносов 2”, содержащей в вычислительном узле по одному 14-ядерному процессору Intel Xeon E5-2697v3, библиотека была сконфигурирована на двухуровневую схему распараллеливания “вычислительный узел / вычислительное ядро”, что позволило эффективно использовать в расчетах все доступные на узле процессорные ядра. Благодаря предусмотренной в библиотеке процедуре агрегирования и перераспределения данных внутри вычислительного узла оказалось возможным обеспечить сопряжение основного кода, распараллеленного в рамках MPI-модели, с библиотекой решения СЛАУ, поддерживающей более сложную модель MPI+POSIX Shared Memory. Следует отметить, что использование гибридных моделей для основного вычислительного приложения в данном случае представляется нецелесообразным, поскольку объем и частота коммуникаций между вычислительными процессами, не считая этапа решения систем линейных алгебраических уравнений, оказываются незначительными.

3. Исследование эффективности алгоритма одновременного расчета нескольких реализаций течения

Верификация предложенного алгоритма и соответствующих теоретических оценок выполняется в три этапа. На первом этапе проверяется корректность оценок ускорения решения СЛАУ с несколькими правыми частями (второй множитель в (1)), а также исследуется зависимость масштабируемости методов от количества одновременно решаемых правых частей. Далее рассматривается время расчета одного шага интегрирования по времени как функция количества одновременно рассчитываемых состояний течения. В завершение проводятся расчеты полной задачи о моделировании турбулентного течения при обтекании массива кубов и демонстрируется корректность оценок в целом.

3.1. Постановка задачи о моделировании течения при обтекании массива кубов

В качестве тестовой в данной работе рассматривается задача о расчете турбулентного течения вязкой несжимаемой жидкости при обтекании массива кубов, расположенных на стенке плоского канала (рис. 1). В соответствии с [6], выбирается расчетная область размером $4h \times 3.4h \times 4h$, эквивалентная ячейке пространственной периодичности массива кубов. На стенках канала и гранях куба ставятся условия прилипания, на боковых гранях расчетной области задается условие периодичности, а на гранях, перпендикулярных направлению набегающего потока, задается условие периодичности и фиксированный расход жидкости.

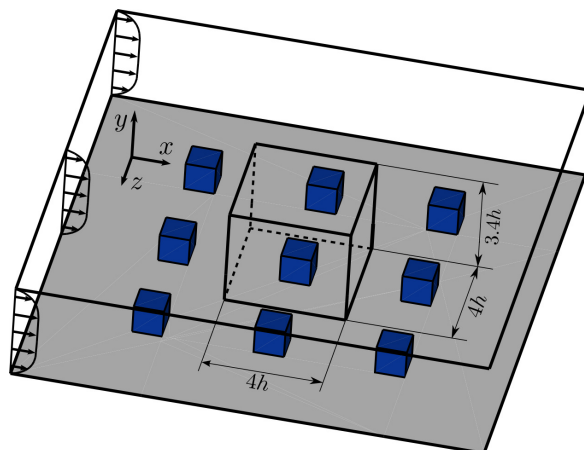


Рис. 1. Схема расчетной области задачи об обтекании массива кубов турбулентным потоком.

Число Рейнольдса, определенное по высоте куба h и среднерасходной скорости U_b , составляет $Re_b = U_b h / \nu = 3854$. Данная задача решается на структурированной расчетной сетке с адаптацией к твердым стенкам. Основные параметры расчетной сетки приведены в табл. 1.

Таблица 1. Основные параметры расчетной сетки.

Общий размер сетки	$144 \times 98 \times 144$
Куб	$52 \times 38 \times 52$
h_x, h_z	$0.0065h - 0.054h$
h_y	$0.0068h - 0.066h$

3.2. Решение СЛАУ с несколькими правыми частями

Эффективность решения СЛАУ с несколькими правыми частями демонстрируется для тестовой матрицы размером 2.03 млн. неизвестных, соответствующей расчетной сетке из табл. 1. Во избежание возможных флуктуаций количества итераций до сходимости итерационного процесса, здесь приводятся времена расчета заданного количества итераций метода решения СЛАУ. Времена расчета для различного числа правых частей и соответствующие ускорения, полученные для одного вычислительного узла, приведены в табл. 2. Решение СЛАУ с несколькими правыми частями позволяет существенно сократить удельное время в пересчете на один вектор и обеспечивает более, чем 2-кратное ускорение для 8 правых частей. Полученные результаты демонстрируют хорошее согласие с теоретической оценкой.

Помимо ускорения расчета для нескольких правых частей за счет сокращения объема считываемых данных, дополнительное преимущество операций с блоками векторов может быть обеспечено за счет лучшей масштабируемости методов. На рис. 2 приведены графики масштабируемости используемых методов решения СЛАУ в зависимости от количества одновременно решаемых правых частей. Увеличение количества правых частей улучшает масштабируемость методов и существенно расширяет пределы эффективной масштабируемости. Указанные графики наглядно демонстрируют преимущество одновременного решения нескольких правых частей при параллельных расчетах. Например, общее ускорение решения СЛАУ с 4 правыми частями при использовании 96 узлов возрастает до 2.69, или в 1.44 раза, по сравнению с расчетом на 1 вычислительном узле.

Таблица 2. Время расчета одной итерации и соответствующее ускорение расчета при решении СЛАУ с несколькими правыми частями, 1 узел.

m	Время, с.	Ускорение	Оценка
1	0.10	-	-
2	0.14	1.45	1.43
4	0.22	1.87	1.82
8	0.38	2.14	2.11

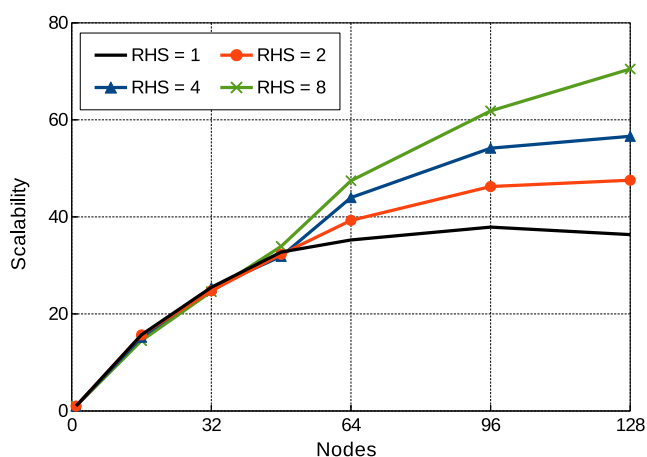


Рис. 2. Масштабируемость используемых методов решения СЛАУ для давления с несколькими правыми частями.

3.3. Оценка общего ускорения на основе расчета нескольких шагов по времени

На втором этапе верификации алгоритма выполнена серия расчетов нескольких шагов интегрирования по времени моделирования течения несжимаемой жидкости. Проведена оценка выигрыша времени расчета для 1, 2, 4 и 8 одновременно рассчитываемых течений в диапазоне от 1 до 72 вычислительных узлов. Полученные результаты ускорения расчетов приведены в табл. 3. Для расчетов на одном вычислительном узле величины ускорений оказываются на 15-20% ниже соответствующих значений для решения СЛАУ, но в целом хорошо воспроизводят имеющуюся тенденцию. По мере увеличения количества задействованных узлов наблюдается прирост ускорения, что коррелирует с результатами на рис. 2. При этом, решение СЛАУ для давления в общем времени расчета шага интегрирования по времени варьируется от 76 до 87%. Таким образом, данные результаты позволяют утверждать, что предложенная оценка ускорения расчета при моделировании нескольких состояний течения адекватно отражает наблюдаемые в расчетах результаты.

3.4. Расчет задачи об обтекании массива кубов турбулентным потоком

В качестве финального этапа верификации предложенной расчетной процедуры проведены два расчета задачи обтекания турбулентным потоком массива кубов. Расчет выполнялся на 48 узлах и проводился для 1 и 4 реализаций течения. Для данной задачи были заданы период интегрирования до выхода на турбулентный режим $T_T = 150$ единиц времени и интервал осреднения $T_A = 1500$ единиц, что для оценки (1) соответствует параметру

Таблица 3. Удельный коэффициент ускорения расчета одного шага по времени за счет одновременного моделирования нескольких состояний.

Узлы	Количество моделируемых состояний течения		
	2	4	8
1	1.33	1.51	1.67
18	1.37	1.68	1.82
32	1.41	1.66	1.93
48	1.53	1.83	2.27
72	1.54	2.00	2.35

$\beta = 10$. Суммарное время интегрирования задачи для одной реализации турбулентного течения соответственно составило $T_1 = T_T + T_A = 1650$ единиц, тогда как для 4 реализаций течения время интегрирования оказалось равным $T_4 = T_T + T_A/4 = 525$ единиц. Графики зависимости трения на стенках канала и на гранях куба для обоих расчетов приведены на рис. 3. Данный график подтверждает выработку турбулентного режима для всех реализаций течения за выбранный интервал T_T . Профили средней скорости для обоих расчетов удовлетворительно согласуются между собой, с экспериментальными результатами и результатами расчетов других авторов (рис. 4).

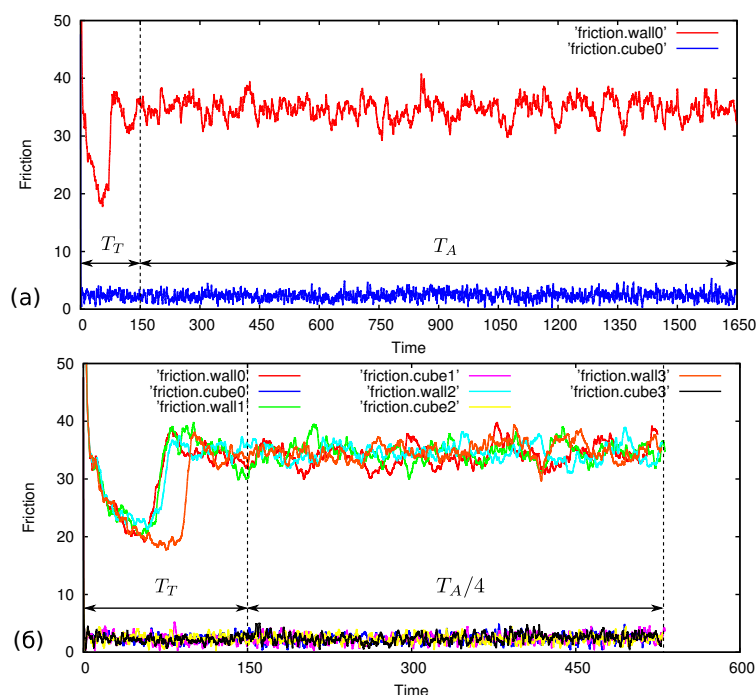


Рис. 3. Поведение трения на стенке канала и на гранях куба от времени для различных начальных данных: (а) расчет единичной реализации течения; (б) расчет четырех реализаций течения.

Исходя из полученных выше оценок, ожидаемое ускорение времени расчета данной задачи на 48 узлах составляет 1.44 раза. Полное время расчета задачи с одной реализацией турбулентного течения составило 664 минуты, а время расчета задачи с 4 реализациями течения – 448 минут. Таким образом, общее ускорение расчета по результатам полноценного

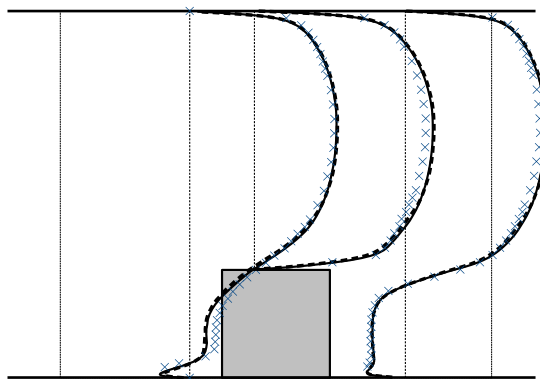


Рис. 4. Осредненные профили продольной компоненты скорости в плоскости симметрии задачи: сплошная линия – осреднение по одному состоянию, пунктирная линия – осреднение по четырем состояниям, маркеры – экспериментальные данные [5].

расчета оказалось равным 1.48 раза, что полностью соответствует теоретическим оценкам.

4. Заключение

В представленной работе проведена детальная верификация предложенного ранее алгоритма расчета турбулентных течений с одновременным моделированием нескольких реализаций этого течения. На примере задачи об обтекании массива кубов на стенке плоского канала проведено исследование эффективности методов решения СЛАУ с несколькими правыми частями, одновременного расчета нескольких гидродинамических течений и расчета турбулентного течения с одновременным моделированием нескольких состояний течения. Показано хорошее согласие экспериментально полученных значений ускорения расчета с теоретическими оценками и продемонстрирована работоспособность предложенного алгоритма моделирования турбулентных течений в целом, который для рассмотренной задачи обеспечил ускорение расчета в 1.48 раза.

Литература

1. Краснопольский Б.И. Одновременное моделирование нескольких состояний турбулентного течения // Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции (26-27 сентября 2016 г., г. Москва), Москва, Изд-во МГУ, 2016. С. 333–342.
2. Nikitin N. Third-order-accurate semi-implicit Runge–Kutta scheme for incompressible Navier–Stokes equations // International Journal for Numerical Methods in Fluids. 2006. Vol. 51. P. 221–233.
3. Trias F.X., Lehmkuhl O. A Self-Adaptive Strategy for the Time Integration of Navier-Stokes Equations // Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals: An International Journal of Computation and Methodology. 2011. Vol. 60. P. 116–134.
4. Gropp W.D., Kaushik D.K., Keyes D.E., Smith B.F. Towards Realistic Performance Bounds for Implicit CFD Codes. Proceedings of parallel CFD'99. 1999. P. 233–240.
5. Meinders E.R., Hanjalic K. Vortex structure and heat transfer in turbulent flow over a wall-mounted matrix of cubes // International Journal of Heat and Fluid Flow. 1999. Vol. 20. P. 255–267.

6. Verstappen R.W.C.P., van der Velde R.M., Veldman A.E.P. DNS of Turbulent Flow and Heat Transfer in a Channel with Surface Mounted Cubes. Proc. ECCOMAS, 2000.
 7. Nikitin N. Finite-difference method for incompressible Navier-Stokes equations in arbitrary orthogonal curvilinear coordinates // Journal of Computational Physics. 2006. Vol. 217. P. 759–781.
 8. Krasnopolsky B., Medvedev A. Acceleration of Large Scale OpenFOAM Simulations on Distributed Systems with Multicore CPUs and GPUs // Parallel Computing: On the Road to Exascale. Series: Advances in Parallel Computing. 2016. Vol. 27. P. 93–102.
-

The efficiency investigation of the multiple turbulent flow states simultaneous modelling approach for the DNS of the flow over a wall-mounted matrix of cubes

B. Krasnopolsky

Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University

The paper is focused on further development of the proposed computational procedure for direct numerical simulation of turbulent flows. The modified computational algorithm is based on the idea of simultaneous modelling of several flow states. The simple theoretical estimates are proposed to compare the modified algorithm with classical approach based on long time-averaging for single flow realization. The corresponding estimates and the modified computational procedure are validated on the case of direct numerical simulation of turbulent flow in the channel with the matrix of the wall-mounted cubes.

Keywords: turbulent flows, direct numerical simulation, systems of linear algebraic equations with multiple right hand sides, speedup

References

1. Krasnopol'skii B.I. Odno vremennoe modelirovaniye neskol'kikh sostoyaniy turbulentnogo techeniya // Superkomp'yuternye dni v Rossii: Trudy mezhdunarodnoi konferentsii (26-27 sentyabrya 2016 g., g. Moskva), Moskva, Izd-vo MGU, 2016. P. 333–342.
2. Nikitin N. Third-order-accurate semi-implicit Runge–Kutta scheme for incompressible Navier–Stokes equations // International Journal for Numerical Methods in Fluids. 2006. Vol. 51. P. 221–233.
3. Trias F.X., Lehmkuhl O. A Self-Adaptive Strategy for the Time Integration of Navier-Stokes Equations // Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals: An International Journal of Computation and Methodology. 2011. Vol. 60. P. 116–134.
4. Gropp W.D., Kaushik D.K., Keyes D.E., Smith B.F. Towards Realistic Performance Bounds for Implicit CFD Codes. Proceedings of parallel CFD'99. 1999. P. 233–240.
5. Meinders E.R., Hanjalić K. Vortex structure and heat transfer in turbulent flow over a wall-mounted matrix of cubes // International Journal of Heat and Fluid Flow. 1999. Vol. 20. P. 255–267.
6. Verstappen R.W.C.P., van der Velde R.M., Veldman A.E.P. DNS of Turbulent Flow and Heat Transfer in a Channel with Surface Mounted Cubes. Proc. ECCOMAS, 2000.
7. Nikitin N. Finite-difference method for incompressible Navier-Stokes equations in arbitrary orthogonal curvilinear coordinates // Journal of Computational Physics. 2006. Vol. 217. P. 759–781.
8. Krasnopolsky B., Medvedev A. Acceleration of Large Scale OpenFOAM Simulations on Distributed Systems with Multicore CPUs and GPUs // Parallel Computing: On the Road to Exascale. Series: Advances in Parallel Computing. 2016. Vol. 27. P. 93–102.